

修 士 論 文 の 和 文 要 旨

研究科・専攻	大学院 情報理工学研究科 先進理工学専攻 博士前期課程		
氏 名	岡 雅義	学籍番号	1033021
論 文 題 目	C ₆₀ フラーレン単結晶の光散乱分光による分子の運動状態に関する研究		

要 旨

フラーレン(C₆₀)はサッカーボール状の点群 I_h に属する分子である。医学、工学などで機能素材として期待されている。ファンデルワールス力により結合した単結晶は室温から冷却すると 256K(=T_c)で C₆₀ 分子の自由回転から回転軸が[111]に配向した束縛回転へ移行し、面心立方(fcc)から単純立方(sc)へ相転移する。Rafailov らは回転の自由度の減少によりラマンスペクトルの H_g モードの線幅が T_c で急激に減少することが報告されている。[1] 一方、Horoyiski らによる高分解能ラマン測定では、H_g モードの線幅は非常に狭く、線幅の急激な減少は観測されておらず、未明な点が残っている。[2]

本研究では、ラマンスペクトルの温度変化の測定から、結晶中の C₆₀ 分子の回転状態とラマンの線幅との関係を明らかにすることを目的としている。

研究に用いた単結晶試料は粉末試料を原料として、昇華法を用いて作成した。ラマン散乱スペクトルの測定には光源に Ar⁺レーザー514.5nm 線を用い、長焦点型対物レンズ(f=32mm)を用いた顕微ラマン法を採用した。研究の過程で C₆₀ はレーザー照射による熱に非常に敏感であり、スペクトルの形状に大きく影響することが分かったので、レーザーパワーを 1.4mW(100mW/cm²)以下とした。試料の冷却には He 循環型クライオスタットを用いた。冷却効率の悪い高温ではチョッパーを使って試料の温度上昇を抑えた。

C₆₀ のラマンスペクトルの温度変化と A_g, H_g モードの線幅の温度変化を図 1、図 2 にそれぞれ示す。1425cm⁻¹ の H_g(7)は 1417cm⁻¹ と 1425cm⁻¹ に分裂している。これは、C₆₀ 分子は結晶場に入ると 5 重縮退の H_g は F_g と E_g に分裂することと一致している。偏光依存測定より 1417cm⁻¹ は F_g、1425cm⁻¹ は E_g であることが明らかになった。H_g(7)の強度の強い E_g モードの線幅と

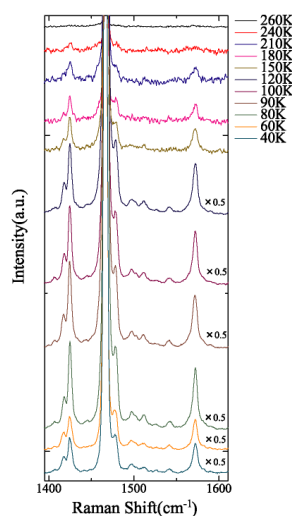


図 1 C₆₀ 単結晶のラマン散乱スペクトル

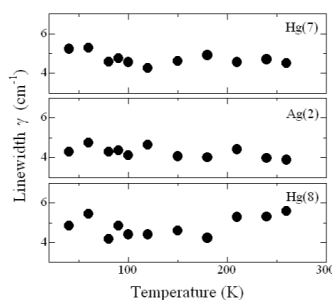


図 2 各モードの線幅の温度変化

[1]P.M.Rafailov, V.G.Hadjiev, A.R.Goni and C.Thomsen, Phys. Rev. B **60**, 13351 (1999).

[2]P. J. Horoyiski, M. L. W. Thewalt, T. R. Anthony, Phys. Rev. B **54**, 920 (1996)

Ag(2)(1467cm⁻¹), H_g(8)(1572cm⁻¹)の線幅の温度依存にはほとんど変化がなく、本研究での装置分解能程度であり、Rafailov らの結果と矛盾している。彼らは結晶場によるモードの分裂を無視し、高温では 2 つのモードを 1 つのピークとして解析していることに問題があることが分かった。また、H_g モードは群論の解析では回転モード F_{1g} と結合していると考えられるが、H_g モードの線幅に温度変化がないことから、ラマンスペクトルから回転モードの知見は得られなかった。